

CODIGO:
DENOMINACION: **FISICA COMPUTACIONAL**
HT: 3
HP: 0
FORMATO: **PRESENCIAL**
Créditos: 3

Descripción del Curso.

Elaboración de modelos de los fenómenos físicos por ordenador de sistemas con muchos grados de libertad, para los cuales ya existe una teoría computacional denominada métodos numéricos. En general, se construyen modelos microscópicos en los cuales las “partículas” obedecen a una dinámica simplificada, y se estudia los que puedan reproducirse las propiedades macroscópicas a partir de este modelo muy simple de las partes constituyentes. Las simulaciones se hacen resolviendo ecuaciones que gobiernan el sistema. Por lo general, son grandes los sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias, ecuaciones diferenciales a derivadas parciales y ecuaciones diferenciales estocásticas, que no pueden ser resueltos explícitamente de manera analítica.

Objetivo general:

Proporcionar al estudiante los conocimientos y los hábitos fundamentales de la física computacional y sus aplicaciones más relevantes en la física del estado sólido (magnetismo, estructura electrónica, dinámica molecular, cambios de fase, etc.), física no-lineal, dinámica de fluidos, astrofísica (simulaciones del Sistema Solar, por ejemplo), física de partículas (teoría de campos/teoría gauge en un retículo espacio-temporal, especialmente para la Cromodinámica Cuántica (QCD)).

Las simulaciones que se realizan en física computacional requieren gran capacidad de cálculo, por lo que en muchos casos es necesario utilizar supercomputadores o clúster de computadores en paralelo.

Objetivos específicos:

- Usar los algoritmos numéricos de solución de problemas en la Física.
- Comprender que en la actualidad la física computacional es una componente muy importante en las investigaciones modernas en la Física de los aceleradores, astrofísica, mecánica de líquidos y gases, teoría de campos, en la Física de plasmas, etc.

Contenido:

Introducción

I.- Nociones sobre las modernas computadoras, modernos software y los elementos de la programación.

1.1.- Principio de funcionamiento de las modernas computadoras.

1.2.- Suministro matemático y lenguajes algorítmicos.

1.3.- Elementos fundamentales del lenguaje FORTRAN y del sistema de cómputo numérico MATLAB.

1.4.- Expresiones aritméticas y operador de atribución

1.5.- Entrada y salida de los datos de los operadores de comando.

1.6.- Subprogramas en el lenguaje FORTRAN y del sistema de cómputo numérico MATLAB.

II.- Métodos fundamentales de cálculo matemático y sus programaciones

2.1.- Métodos de solución de las ecuaciones trascendentes y de sistemas de ecuaciones lineales.

2.2.- Métodos de las aproximaciones sucesivas.

2.3.- Métodos de las diferencias finitas para la solución de problemas extremos simples.

2.4.- Métodos variacionales.

2.5.- Método de Montecarlo.

III.- Modelación de sistemas con gran número de partículas en interacción

3.1.- Modelación directa de fuerzas de acción a distancia en un sistema con gran cantidad de partículas.

3.2.- Valor medio de un conjunto por el método de Monte Carlo.

- 3.3.- Cálculo del valor medio del campo de un sistema de partículas cargadas.
- 3.4.- Modelo de partícula sin colisiones en una celda (PIC method)
- 3.5.- Aplicaciones del modelo de partículas en celdas para la modelación de plasmas.
- 3.6.- Análisis numérico de la inestabilidad de los dos haces de partículas cargadas.
- 3.7.- Método de las diferencias finitas para la solución de la ecuación de Vlasov.
- 3.8.- Método de la “bolsa de agua”
- 3.9.- Modelación de campos de interacción colectiva en la teoría del cuerpo sólido.
- 3.10.- Solución numérica de las ecuaciones de Hartree-Fock.

Metodología Recomendada:

Se recomienda el uso de un moderno laboratorio computacional, equipado con los modernos sistemas de computación numérica y softwares. Los profesores facilitadores además de las clases expositivas deben recurrir a discusiones de los conceptos fundamentales, demostraciones e ilustraciones de resolución de problemas típos de la Física del computacional por los participantes, así como a las técnicas de preguntas y respuestas sobre el contenido de la teoría expuesta. El facilitador promoverá la participación y procurará el análisis de casos que permitan aplicar los nuevos conocimientos a la solución de problemas científicos tecnológicos. Se sugiere, además, el uso de materiales, equipo didáctico y tecnológico para la complementación de las clases

Evaluación:

La distribución de la evaluación recomendada es la siguiente:

Presentaciones y desarrollo de tareas individuales:	20
Trabajos del laboratorio	25
Exámenes parciales	20
Examen o trabajo Semestral	35
TOTAL	100

El facilitador hará los ajustes que considere necesario, en función de los objetivos, de las estrategias y las actividades que plantee en el programa analítico de la asignatura, considerando que el examen semestral o en su defecto el trabajo semestral final, no puede exceder de 1/3 de la calificación final.

Bibliografía:

- A.K. Hartmann, Practical Guide to Computer Simulations, World Scientific (2009)
 - International Journal of Modern Physics C (IJMPC): Physics and Computers, World Scientific
- Steven E. Koonin, Computational Physics, Addison-Wesley (1986)
- T. Pang, An Introduction to Computational Physics, Cambridge University Press (2010)
- B. Stickler, E. Schachinger, Basic concepts in computational physics, Springer Verlag (2013). ISBN 9783319024349.
- E. Winsberg, *Science in the Age of Computer Simulation*. Chicago: University of Chicago Press, 2010.